

MODELO NUMÉRICO DE MALHA ADAPTATIVA DA EXPANSÃO CARBONOSA DE TINTAS INTUMESCENTES

Luís M. R. Mesquita¹, Paulo A. G. Piloto¹, Mário A. P. Vaz²

1: Departamento de Mecânica Aplicada
Instituto Politécnico de Bragança
Campus Santa Apolónia, Ap. 1134, 5301-857 Bragança, Portugal
e-mail: {lmesquita, ppiloto}@ipb.pt, web: <http://www.ipb.pt>

2: Departamento de Engenharia Mecânica
Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto
Rua Dr Roberto Frias, S/N 4200-465 Porto, Portugal
e-mail: gmavaz@fe.up.pt web: <http://www.fe.up.pt>

Palavras-chave: Tinta Intumescente, Protecção ao Fogo, Testes Experimentais, Modelo Numérico, Fronteira Móvel, Malha Adaptativa.

Resumo. *As tintas intumescentes são materiais reactivos utilizados na protecção ao fogo de elementos estruturais. Quando em contacto com os gases quentes provenientes de um incêndio, dá-se uma expansão volumétrica cuja camada carbonosa reduz a transferência de calor à camada virgem de tinta e ao substrato subjacente. Este processo é altamente não linear e geometricamente caracterizado por duas fronteiras móveis: a fronteira em contacto com o incêndio e a superfície que separa as camadas virgem e carbonosa, podendo ser caracterizado como um problema generalizado de Stefan.*

É apresentado um método numérico baseado no método das linhas (MOL), com uma malha espacial adaptativa e refinamento local, método r-h, cuja evolução temporal é determinada de forma desacoplada à discretização das equações diferenciais da energia e da conservação da massa. O método numérico é aplicado ao problema unidimensional de Stefan de duas fases e à equação viscosa de Burger. As soluções apresentadas mostram a adaptação da malha à solução do problema, aumentando ou diminuindo o número de nós em função da estimativa de “erro” apresentada.

O modelo numérico é aplicado ao estudo do comportamento de uma tinta intumescente exposta à curva de incêndio padrão ISO834. Os resultados numéricos são comparados com os obtidos em ensaios experimentais num forno de resistência ao fogo.

1. ENSAIOS EXPERIMENTAIS EM PLACAS DE AÇO EXPOSTAS À ISO834

Para avaliar a eficiência da protecção de duas tintas intumescentes de base aquosa, foi conduzido um conjunto de ensaios realizados num forno de resistência ao fogo. A protecção foi aplicada em placas de aço quadradas, 100 [mm], com 4, 6, 8 e 14 [mm] de espessura, pintadas numa das faces com espessuras secas de protecção que variam nominalmente entre 0.5 e 1.5 [mm], conforme apresentado na Tabela 1. Este estudo é análogo a um anterior realizado num calorímetro de cone [1], em que as placas foram expostas a um fluxo de calor radiante constante de 35 e 75 [kW/m²]. Neste caso a exposição térmica é definida pela curva de incêndio padrão ISO834, simulando de modo mais realístico o efeito da acção de um incêndio.

Teste n°	Tinta	Esp. Placa [mm]	DFT [μm]	Maior [μm]	Menor [μm]	Desv. Padrão [μm]	dp _{máx} [mm]	E _{máx} = dp/DFT	dp _{Fim} [mm]	E _{Fim} = dp/DFT
1	PA	4	584	707	478	58.7	18,72	32,05	10,74	18,39
2	PA	4	1032	1145	902	77.7	30,60	29,65	21,40	20,74
3	PA	4	1430	1560	1200	113.0	32,12	22,46	22,05	15,42
4	PB	4	1016	1179	729	115.0	72,62	71,48	45,90	45,18
5	PB	4	1067	1218	921	83.1	71,37	66,89	43,14	40,43
6	PB	4	1560	1800	1340	148.0	-	-	-	-
7	PA	4	772	926	644	91.3	46,16	59,79	37,85	49,03
8	PA	4	1230	1370	1090	63.4	41,34	33,61	33,63	27,34
9	PA	4	1520	1850	1310	157	69,50	45,72	58,95	38,78
10	PA	6	1060	1350	721	163	32,63	30,78	24,68	23,28
11	PA	8	1060	1240	780	140	34,15	32,22	23,36	22,04
12	PA	14	1190	1330	1050	78.8	48,80	41,01	39,52	33,21

Tabela 1 – Conjunto de ensaios experimentais realizados no forno de resistência ao fogo, (DFT: espessura seca de tinta).



Figura 1 – Instrumentação das placas com termopares. Fase inicial e final do teste n° 12.

A evolução da temperatura no interior do forno é medida através de um termopar de placa, segundo as especificações da norma EN1363-1 [2], e controlada por um controlador PID. A variação da temperatura das placas de aço foi medida através de termopares do tipo k soldados na face exposta à acção do fogo e na face oposta em dois pontos distintos. As placas de aço são colocadas num volume “escavado” de uma placa de fibra cerâmica, de baixo valor de condutividade térmica, garantindo que a superfície protegida é a única exposta aos gases quentes do incêndio, ver a Figura 1.

1.1 Resultados dos ensaios experimentais

O registo da variação da temperatura do forno e das placas de aço foi efectuado com o sistema de aquisição de sinal MGCPlus. Para efeitos de comparação é também apresentada a variação da temperatura de placas de referência sem protecção intumescente.

A variação da temperatura das placas sem protecção e com distintas espessuras de protecção é apresentada na Figura 2 à Figura 9.

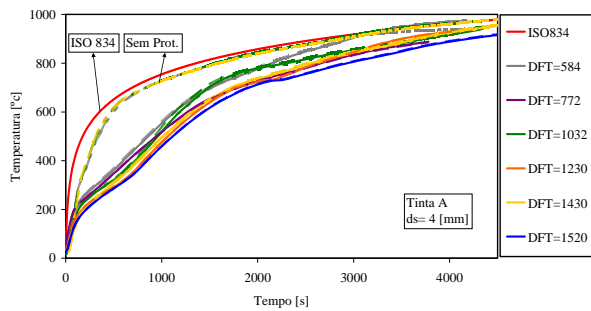


Figura 2 - Variação da temperatura do aço em placas de 4 [mm] com diferentes espessuras de protecção de tinta A.

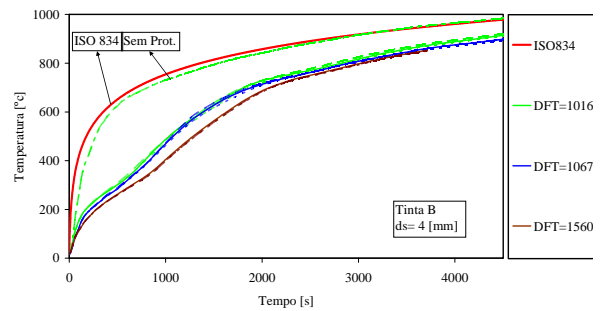


Figura 3 - Variação da temperatura do aço em placas de 4 [mm] com diferentes espessuras de protecção de tinta B.

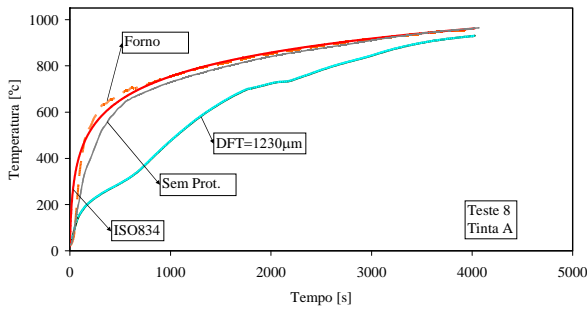


Figura 4 - Variação da temperatura de uma placa de aço com 4 [mm] de espessura e uma espessura de protecção de 1230 [μm] de tinta A.

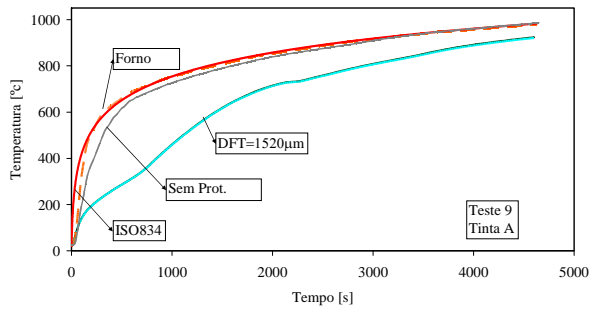


Figura 5 - Variação da temperatura de uma placa de aço com 4 [mm] de espessura e uma espessura de protecção de 1520 [μm] de tinta A.

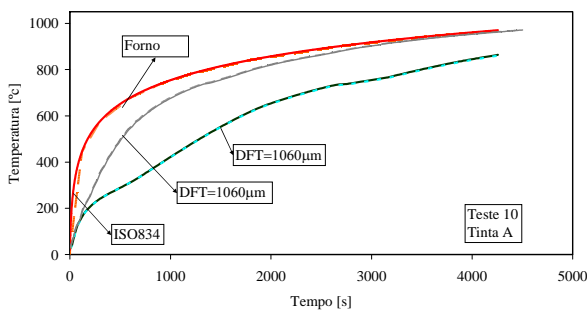


Figura 6 - Variação da temperatura de uma placa de aço com 6 [mm] de espessura e uma espessura de protecção de 1060 [μm] de tinta A.

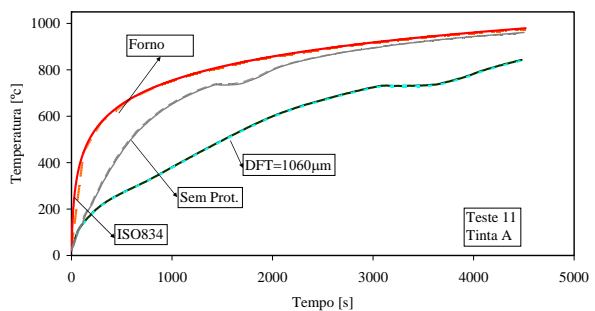


Figura 7 - Variação da temperatura de uma placa de aço com 8 [mm] de espessura e uma espessura de protecção de 1060 [μm] de tinta A.

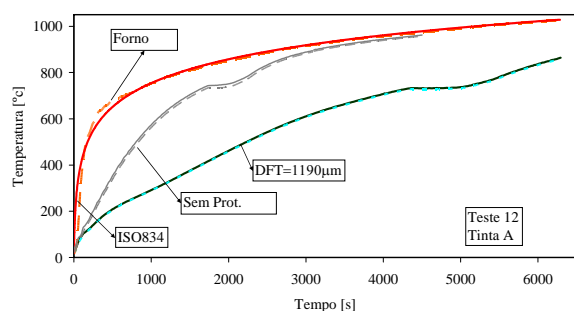


Figura 8 - Variação da temperatura de uma placa de aço com 14 [mm] de espessura e uma espessura de protecção de 1190 [µm] de tinta A.

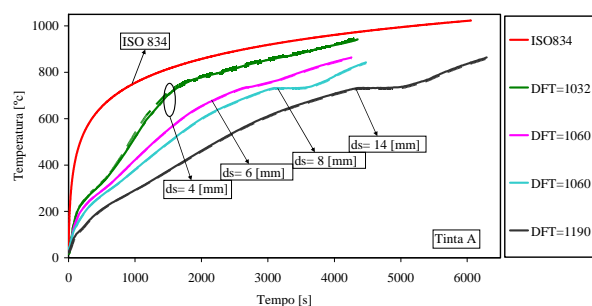


Figura 9 - Influência da espessura das placas na evolução da temperatura do aço considerando uma espessura de aproximadamente 1000[µm] de tinta A.

Os resultados mostram uma influência significativa da espessura de protecção, demorando mais tempo para se atingir uma determinada temperatura, isto é, aumentando o tempo de resistência ao fogo. Comparativamente e considerando uma espessura de protecção equivalente, a tinta B tem um desempenho ligeiramente mais eficiente do que a tinta A. Os ensaios foram gravados em modo contínuo através de uma câmara digital para análise da expansão da intumescência. Numa fase posterior foram utilizados fotogramas discretos ao longo do tempo e medido o perfil da intumescência através de processamento de imagem realizado no software Matlab. Na Figura 10 são apresentados alguns destes fotogramas ao longo da execução do teste 10, nos quais se pode verificar a evolução da camada intumescente.

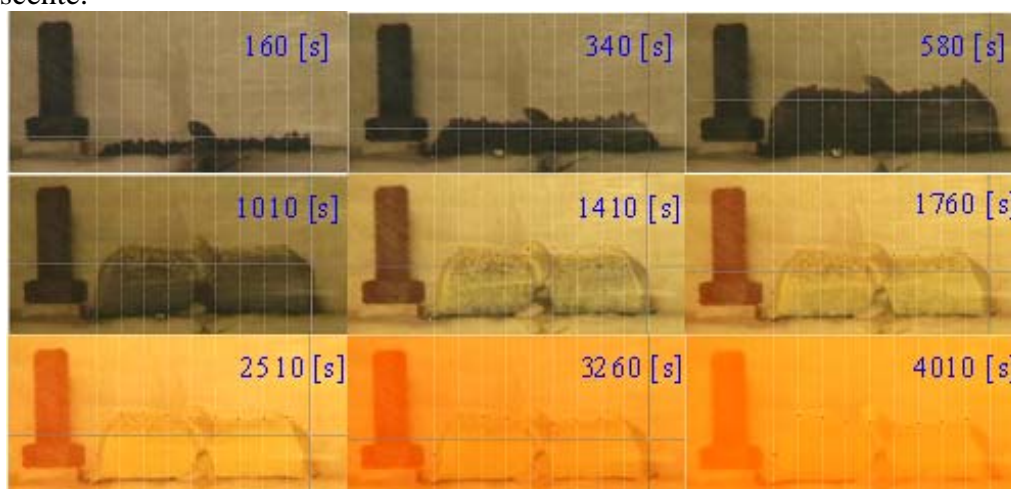


Figura 10 - Fotogramas da evolução da intumescência do teste 10.

Os resultados das medições efectuadas à expansão da intumescência dos testes realizados à tinta A e B são apresentados na Figura 11 e na Figura 12, respectivamente. As figuras mostram uma intumescência máxima mais elevada na tinta B, conforme os valores apresentados na Tabela 1. Tomando como exemplo os testes 2 e 4, com uma espessura nominal de protecção igual a 1000[µm] aplicada a placas com uma espessura de 4 [mm], a

expansão máxima, E_{\max} , e no final do teste, E_{Fim} , é de aproximadamente 30 e 20 vezes a espessura inicial, no caso da tinta A, e de 71 e 45 vezes no caso da tinta B.

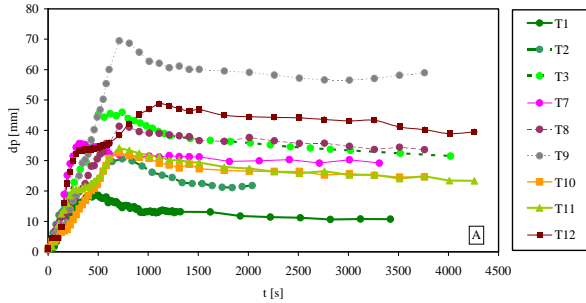


Figura 11 - Resultados experimentais da variação da espessura da camada intumescente dos testes realizados com tinta A.

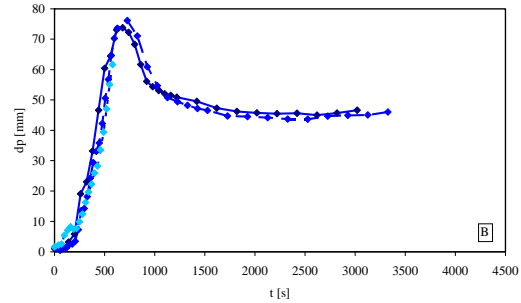


Figura 12 - Resultados experimentais da variação da espessura da camada intumescente dos testes realizados com tinta B.

2. MÉTODO NUMÉRICO DE REFINAMENTO DE MALHA E DE MALHA MÓVEL BASEADO NO CRITÉRIO DE EQUIDISTRIBUIÇÃO

Ao longo dos anos têm sido apresentados vários métodos de malha adaptativa aplicados à resolução de PDEs. As três estratégias principais de malha adaptativa são: os métodos de refinamento estático, métodos de refinamento dinâmico ou de malha móvel e os métodos de refinamento da ordem da aproximação polinomial. No primeiro, conhecido por refinamento h-adaptativo, a localização dos nós é fixa e a malha é adaptada ao problema através da adição ou remoção de nós onde estes são ou deixam de ser necessários. Nos métodos de malha móvel, refinamento r-adaptativo, os nós são deslocados continuamente no espaço e no tempo, em semelhança com os métodos Lagrangianos clássicos, em que a discretização do problema é acoplado a um segundo sistema de ODEs de definição do movimento da malha. O refinamento p-adaptativo é frequentemente combinado com o refinamento h na aplicação do método dos elementos finitos e indica a possibilidade de o processo numérico incluir uma aproximação polinomial de ordem variável. Na prática é possível implementar combinações dos vários métodos: refinamento h-p, h-r, r-p e até refinamento h-p-r adaptativo, [3].

O primeiro desenvolvimento surgiu com o trabalho de Miller e Miller [4], que efectuaram a discretização espacial pelo MEF, permitindo que os nós da malha se movam de acordo com um sistema de EDOs acoplado ao sistema de EDOs do problema físico a resolver. Os dois sistemas de equações são resolvidos simultaneamente mantendo fixo o número de nós da malha. Este método é denominado por Método de Elementos Finitos Móveis (MEFM). White propôs uma alternativa ao procedimento anterior, no qual o movimento espacial da malha é baseado num critério de equidistribuição, [5].

Considerando o método original de White, admita-se que a posição dos nós $x_i, i=1...N$ é definida de forma a garantir que uma grandeza de referência da solução numérica, denominada de função peso $m(x,t)$, é distribuída equitativamente em todo o domínio

espacial, isto é:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} m(x, t) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} m(x, t) dx = c, \quad 2 \leq i \leq N-1 \quad (1)$$

A transformação de variáveis do domínio físico (x, t) para o domínio computacional uniforme (ξ, t) é efectuada pela relação:

$$\xi(x) = \frac{\int_{x_L}^{x_i(\xi, t)} m(x, t) dx}{\theta(t)}, \quad \theta(t) = \int_{x_L}^{x_R} m(x, t) dx \quad (2)$$

em que $\xi_i = i-1/(N-1), i=1, \dots, N$. A escolha da função peso é fundamental para um correcto movimento/refinamento da malha. No entanto não existe uma regra geral para todos os problemas. Nas aplicações encontradas na literatura a função peso é baseada em: estimativas de erro de truncatura locais; variações da solução; valores da curvatura da solução, que coloca mais nós nas zonas em que a segunda derivada da solução é mais elevada; e no comprimento do arco da solução. A mais utilizada é a função baseada no comprimento do arco, definida por $m = \sqrt{1 + (u_x)^2}$, que coloca nós ao longo de intervalos com um comprimento de arco uniforme.

Seguindo a metodologia utilizada pelo método das linhas (MOL), são quatro as etapas normalmente utilizada para a implementação de um algoritmo de refinamento estático, [6]:

- . *Aproximação das derivadas espaciais de uma malha não uniforme;*
- . *Integração do sistema de EDOs resultante ao longo de Δt incrementos de tempo;*
- . *Cálculo da função peso e movimento dos nós de acordo com o princípio da equidistribuição;*
- . *Interpolar a solução para gerar as condições iniciais da nova malha.*

A vantagem deste tipo de implementação é o desacoplamento da solução do problema com o refinamento adaptativo da malha, logo é de maior facilidade de implementação numérica e permite a utilização de um número variável de nós. Como a integração temporal deve ser interrompida ao fim de um ou vários incrementos de tempo origina um esforço computacional mais elevado. O processo de interpolação da malha anterior para a nova malha introduz erros adicionais à solução numérica.

Actualmente existem vários algoritmos disponíveis para a solução de sistemas de PDEs unidimensionais baseados no MOL. O problema a resolver é normalmente posto na forma definida pelas equações (3)-(5):

$$u_t(x, t) = f(x, t, u(x, t), u_x(x, t), u_{xx}(x, t)), \quad x_L \leq x \leq x_R, \quad t > 0 \quad (3)$$

com condição inicial

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x_L \leq x \leq x_R, \quad t = 0 \quad (4)$$

e condições de fronteira

$$\begin{aligned} b_L(t, u(x_L, t), u_x(x_L, t)) &= 0, & t \geq 0 \\ b_R(t, u(x_R, t), u_x(x_R, t)) &= 0, & t \geq 0 \end{aligned} \quad (5)$$

A utilização do Matlab como linguagem e ambiente de programação, permite recorrer a vários *solvers* para resolver numericamente os sistemas de EDOs. Como exemplo destes temos o ode23, ode45, ode15s, ode23s, etc., cabendo ao utilizador a sua selecção em função do tipo de equação.

2.1 Método adaptativo de malha móvel

Uma alternativa ao processo descrito anteriormente é mover os nós continuamente no tempo, isto é, utilizar um refinamento dinâmico e acoplar a solução do problema com as trajectórias temporais dos nós da malha.

Considerando a solução do problema (3-5) sob uma malha cujos nós se movem ao longo da variável temporal do problema, com trajectórias definidas por $x_i(t), i=1..N$, o problema enunciado requer a utilização de uma formulação Lagrangeana em que a derivada temporal total de u é obtida por:

$$\dot{u} = u_t + \dot{x}u_x = f(u) + \dot{x}u_x \quad (6)$$

Com a discretização espacial de (6), aproximando a primeira derivada com uma diferença finita central, obtém-se o sistema de EDOs definido por (7).

$$\dot{u}_i - \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \dot{x}_i = f_i, \quad t > t_0 \quad 1 \leq i \leq N \quad (7)$$

Para resolver a EDO anterior são necessárias equações adicionais que especifiquem a variação no tempo da posição dos nós da malha [7]. O sistema de EDOs que define as trajectórias dos nós da malha pode ser definido através de grandezas físicas cuja variação temporal é conhecida ou pela equidistribuição espacial de uma variável da solução que reflecta a sua variação no domínio. O sistema total combinado pode ser escrito da seguinte forma.

$$\begin{aligned} \dot{U} - D\dot{X} &= F \\ \tau B\dot{X} &= g \end{aligned} \quad (8)$$

Ou, rearranjando

$$A(Y)\dot{Y} = L(Y) \quad (9)$$

em que $Y = (\dots, u_i^1, \dots, u_i^{NPDE}, \dots, x_i, \dots)^T$.

2.2 Suavização espacial e temporal do movimento nodal

Uma parte significativa dos métodos de resolução das equações (8) ou (9) originam uma perda da taxa de convergência e um aumento do erro quando as variações da malha são

significativas. Para diminuir esta influência, Dorfi e Drury [8] apresentaram uma estratégia de suavização espacial e temporal do movimento nodal. Esta suavização previne uma distorção excessiva do espaçamento nodal em relação aos espaçamentos adjacentes e atenua a oscilação temporal da malha.

O objectivo consiste na definição de uma malha que verifique a equação de equidistribuição definida pela equação (1). Reescrevendo em função da concentração nodal ($n_i = 1/\Delta x_i$):

$$\frac{n_{i-1}}{M_{i-1}} = \frac{n_i}{M_i}, \quad 2 \leq i \leq N-1 \quad (10)$$

A suavização espacial é prescrita através da substituição da concentração nodal por:

$$\begin{aligned} \tilde{n}_0 &= n_0 - k(k+1)(n_1 - n_0) \\ \tilde{n}_i &= n_i - k(k+1)(n_{i+1} - 2n_i + n_{i-1}), \quad 2 \leq i \leq N-1 \\ \tilde{n}_N &= n_N - k(k+1)(n_{N-1} - n_N) \end{aligned} \quad (11)$$

em que k é um parâmetro positivo igual a 1 ou 2. Esta suavização assegura um constrangimento superior e inferior do espaçamento da malha, garantindo que estes não diferem substancialmente entre si, sendo equivalente a:

$$\frac{k}{(k+1)} \leq \frac{n_{i-1}}{n_i} \leq \frac{(k+1)}{k} \quad (12)$$

Para um valor de N e uma distribuição da função peso M , a escolha de k determina o comprimento mínimo e máximo do espaçamento.

Uma alternativa ao procedimento anterior, implementada por [9], consiste na utilização de uma suavização espacial local dos nós através da suavização da função peso aos nós adjacentes, isto é:

$$\tilde{M}_i = \sum_{j=i-p}^{i+p} \left(\frac{k}{k+1} \right)^{|i-j|} M_j \quad (13)$$

Onde p é um inteiro positivo, normalmente considerado igual a 1 ou 2, que define o número de pontos que contribuem para a média pesada da função peso e k , igual a 2, define o peso de cada ponto. Esta estratégia também pode ser aplicada directamente aos nós da malha, originando bons resultados, [10].

$$\Delta \tilde{x}_i = \sum_{j=i-p}^{i+p} \left(\frac{k}{k+1} \right)^{|i-j|} \Delta x_j \quad (14)$$

O algoritmo utilizado considera um refinamento estático e iterativo, em que a malha é equidistribuída e suavizada iterativamente durante um número predeterminado de ciclos ($iter=5$) e até que não ocorram variações significativas na malha ($norm(x_{new} - x) < 1e^{-6}$). Este procedimento consiste em resolver sucessivamente o sistema de equações ($[A][\Delta x] = [b]$)

definido pela equação (15), em que $\mu = k(k+1)$.

$$\begin{bmatrix}
 1+\mu & -\mu & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\
 -\mu & 1+2\mu & -\mu & 0 & & & & & \vdots \\
 0 & -\mu & 1+2\mu & -\mu & & & & & \vdots \\
 \vdots & & & \ddots & & & & & \vdots \\
 \vdots & & & & \ddots & & & & \vdots \\
 \vdots & & & & & \ddots & & & \vdots \\
 \vdots & & \text{Sim} & & & & -\mu & 1+2\mu & -\mu & 0 \\
 \vdots & & & & & & 0 & -\mu & 1+2\mu & -\mu \\
 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & -\mu & 1+\mu
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 \Delta\tilde{x}_1 \\
 \Delta\tilde{x}_2 \\
 \Delta\tilde{x}_3 \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 \Delta\tilde{x}_{N-3} \\
 \Delta\tilde{x}_{N-2} \\
 \Delta\tilde{x}_{N-1}
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 \Delta x_1 \\
 \Delta x_2 \\
 \Delta x_3 \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 \Delta x_{N-3} \\
 \Delta x_{N-2} \\
 \Delta x_{N-1}
 \end{bmatrix}
 \quad (15)$$

2.3 Equidistribuição da malha pelo algoritmo de de Boor

Também baseado no conceito de equidistribuição, de Boor [11] desenvolveu um algoritmo com aplicações à optimização da aproximação *spline* com um número de nós variável. A sua versão original considera uma interpolação constante para a discretização da aproximação da função peso. Kopteva e Stynes [12] aplicaram este processo iterativo de malha adaptativa a um problema de convecção e difusão pelo método das diferenças finitas em que a função peso é definida pelo comprimento do arco. Também provam a existência de uma malha que equidistribui o comprimento do arco ao longo de uma solução polinomial. Mais recentemente Xu et al,[13], analisam a convergência do algoritmo de de Boor, verificando um aumento da taxa de convergência com o aumento do número de nós e fornecem um critério de paragem para a sua implementação.

O algoritmo consiste na definição da função peso e da solução numérica do problema implicitamente necessária, para uma malha inicial arbitrária x_i^k . A sua aproximação constante no intervalo $h_i^k = x_i^k - x_{i-1}^k$ é definida por $\tilde{M}_i = (M_i + M_{i-1})/2$. A malha x_i^{k+1} que equidistribui esta aproximação da função peso é obtida por:

$$\int_{x_L}^{x_i^{k+1}} \tilde{M}^k dx = \xi_i \int_{x_L}^{x_R} \tilde{M}^k dx, \quad i = 1, \dots, N \quad (16)$$

em que $x_i = x(\xi_i)$, com $\xi_i = (i-1)/(N-1)$, $i = 1 \dots N$. A nova malha pode ser determinada explicitamente por:

$$\sum_{i=2}^j (x_i^k - x_{i-1}^k) \tilde{M}_i = \xi_j \sum_{i=2}^N (x_i^k - x_{i-1}^k) \tilde{M}_i, \quad j = 2, \dots, n, \quad (17)$$

encontrando-se o índice n que garanta: $l(x_{n-1}^k) < \xi_j L(x_{x_R}^k) \leq l(x_n^k)$. Os nós ficam assim

definidos por:

$$x_i^{k+1} = x_{n-1}^k + \frac{\xi_i L(x_{x_R}^k) - L(x_{n-1}^k)}{\tilde{M}_n}, \quad i = 1, \dots, N-1. \quad (18)$$

O processo iterativo é terminado quando se verifica o seguinte critério:

$$\|x^{k+1} - x^k\|_\infty \equiv \max_i |x_i^{k+1} - x_i^k| \leq Tol.. \quad (19)$$

2.4 Aplicação do modelo numérico à equação de Burger

De modo a ilustrar as vantagens do método adaptativo de malha móvel (MMPDE), considere-se o exemplo de teste definido pela equação de Burger unidimensional:

$$u_t = -(0.5u^2)_x + \mu u_{xx} \quad (20)$$

Trata-se de uma EDP parabólica não linear que possui solução analítica (21) e que é frequentemente utilizada para avaliar a qualidade de algoritmos e soluções numéricas.

$$u(x, t) = \frac{0.1e^{-0.05(z-0.5+4.95t)/\mu} + 0.5e^{-0.25(z-0.5+0.75t)/\mu} + e^{-0.5(z-0.375)/\mu}}{e^{-0.05(z-0.5+4.95t)/\mu} + e^{-0.25(z-0.5+0.75t)/\mu} + e^{-0.5(z-0.375)/\mu}} \quad (21)$$

A solução numérica é obtida pela metodologia clássica do MOL através do método das diferenças finitas, considerando uma malha inicial uniforme. As condições iniciais e de fronteira, entre $x=0$ e $x=1$, são obtidas através da solução exacta apresentada. Antes do primeiro passo temporal é aplicado o método de equidistribuição da malha através do algoritmo de de Boor e posterior aproximação das derivadas de primeira e segunda ordem através de diferenças finitas não uniformes centrais de segunda ordem. A integração temporal é efectuada com recurso ao integrador numérico *ode15s* utilizando uma tolerância absoluta e relativa do erro de 10^{-6} . Após cada etapa de integração num pequeno incremento de tempo, realiza-se a (i) equidistribuição da malha, (ii) interpolação (cúbica) da solução para produzir condições iniciais na nova malha e (iii) aproximação das derivadas espaciais.

Como a malha se mantém constante durante o intervalo de integração, este valor deve estar associado a uma variação pouco significativa da solução de modo a que as variações mais abruptas se mantenham dentro do domínio espacial mais discretizado. Esta é a fragilidade mais significativa deste método em comparação com os algoritmos baseados no MMPDE e, como exemplo, implementado no Matlab através da toolbox MatMol [14] (<http://www.matmol.org/>).

Na Figura 13 são apresentadas as soluções analítica e numérica da equação de Burger com uma viscosidade de $\mu=0.001$ e com uma malha de 81 pontos. A integração e a equidistribuição da solução são realizados em intervalos de 0.01. A figura mostra a aplicabilidade do algoritmo a problemas transientes, verificando-se um maior refinamento espacial nas zonas em que a variação da solução é superior.

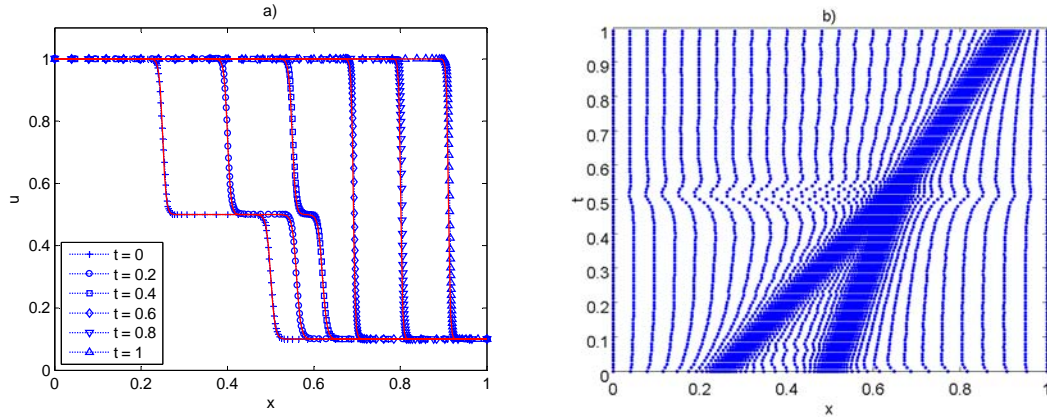


Figura 13 – Resultados da aplicação do método de malha adaptativa aplicado à equação de Burger ($\mu = 1e^{-3}$ e $N=81$). a) Comparação da solução analítica e numérica. b) Evolução espacial da malha com o tempo.

2.5 Aplicação do modelo numérico ao problema de Stefan de duas fases

Como forma de teste do método adaptativo de malha móvel aplicado a problemas com fronteira móvel, considere-se o problema clássico de Stefan que descreve a fusão/congelamento de água. Este exemplo é considerado por vários autores para a comparação da performance dos vários métodos numéricos aplicados a problemas de fronteira móvel [15-17].

Considere-se um sistema de duas fases ($n=2$) em que as equações diferenciais de condução de calor são definidas por

$$C_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{\partial T_i}{\partial x} \left(k_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial x} \right) \quad (22)$$

em que o índice $i=1..n$ corresponde às n fases. $C_i = \rho c_i$ representa a capacidade de calor volumétrica, k_i as condutividades térmicas e T_i as temperaturas. Se a mudança da fase i para a fase $i+1$ ocorre a uma temperatura específica $T = T_m$ na posição $x = s_i(t)$, as condições de fronteira existente nesta fronteira móvel são:

$$\begin{aligned} T_i|_{s_i(t)} &= T_{i+1}|_{s_{i+1}(t)} = T_m \\ k_{i+1} \frac{\partial T_{i+1}}{\partial x} \Big|_{s_i(t)} - k_i \frac{\partial T_i}{\partial x} \Big|_{s_i(t)} &= \rho_i L_i \frac{ds_i(t)}{dt} \end{aligned} \quad (23)$$

Com L_i igual ao calor latente por unidade de massa e ds/dt a velocidade da interface. As fases $i=1$ e $i=2$ representam as fases sólida e líquida, respectivamente. As duas condições impõem a continuidade da temperatura e o balanço energético na fronteira móvel. O caso particular aqui analisado corresponde a uma região semi-infinita de água, inicialmente com uma temperatura constante, $T_0 = 10[^\circ\text{C}]$, superior à de solidificação, $T_m = 0.0[^\circ\text{C}]$. No

instante $t > 0$ a fronteira $x_L = 0$ é mantida a uma temperatura inferior à de solidificação $T_L = -20[^\circ\text{C}]$, provocando a solidificação da interface, que absorvendo uma grande quantidade de calor latente, vai avançando ao longo do domínio líquido, conforme indicado na Figura 14.

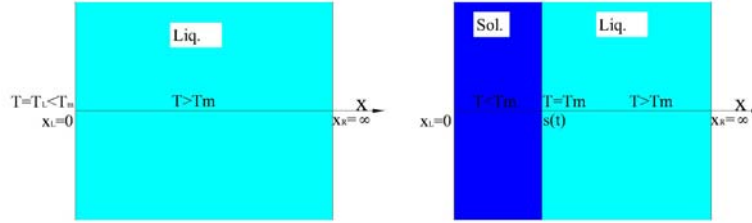


Figura 14 – Modelo unidimensional do problema de Stefan.

Este sistema fica completo com as seguintes condições iniciais e condições prescritas nas fronteiras fixas.

$$\begin{aligned} T_1(0, t) = T_L = -20, \quad \frac{\partial T_2}{\partial x} = 0 \quad , x \rightarrow \infty, t > 0 \\ T_1(x, 0) = T_2(x, 0) = T_0 = 10 \quad x \geq 0 \end{aligned} \quad (24)$$

Devido à elevada não-linearidade dos problemas com fronteira móvel, até os problemas unidimensionais se mostram de difícil implementação numérica. Do ponto de vista analítico só em casos muito particulares e de elevada simplicidade se podem obter soluções exactas. Para o problema apresentado anteriormente, considerando o domínio como semi-infinito e com massa específica igual em ambas as regiões, a solução exacta é dada pelas equações [15, 18];

$$\begin{aligned} T_s(x, t) &= T_L + (T_m - T_L) \left(\frac{\text{erf}(x/\sqrt{4\alpha_s t})}{\text{erf}(\phi)} \right), \quad x < s(t) \\ T_l(x, t) &= T_0 + (T_m - T_0) \left(\frac{\text{erfc}(x/\sqrt{4\alpha_l t})}{\text{erfc}(\phi\sqrt{\alpha_s/\alpha_l})} \right), \quad x > s(t) \\ s(t) &= 2\phi\sqrt{\alpha_s t} \end{aligned} \quad (25)$$

Com $\alpha_i = k_i/C_i$ e ϕ obtido pela solução da equação transcendental seguinte.

$$\frac{e^{-\phi^2}}{\text{erf}(\phi)} + \frac{T_0 - T_m}{T_L - T_m} \frac{k_l}{k_s} \sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}} \frac{e^{-\phi^2 \alpha_s/\alpha_l}}{\text{erfc}(\phi\sqrt{\alpha_s/\alpha_l})} + \frac{\phi \rho_s L \sqrt{\pi}}{C_s (T_L - T_m)} = 0 \quad (26)$$

Nas equações anteriores erf representa a função erro, obtida por integração de uma distribuição normal:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-z^2} dz \quad (27)$$

e erfc representa a função erro complementar, $\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x)$.

As propriedades físicas da água e do gelo são as consideradas por [15]: $k_s = 2.22$, $k_l = 0.556$, $C_s = 1.762$, $C_l = 4.226$ e $L = 338$.

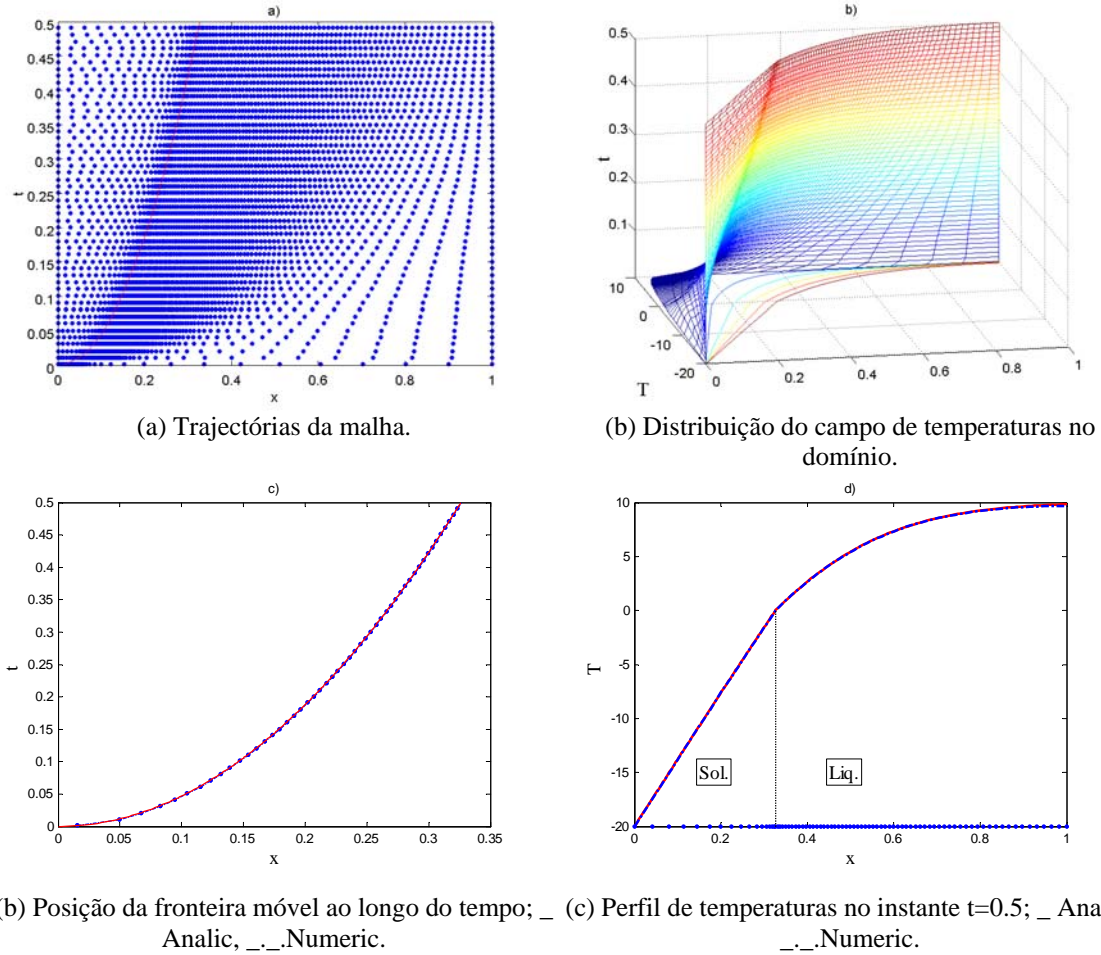


Figura 15 – Comparação da solução numérica e analítica do problema de Stefan.

A solução numérica é obtida através do método das linhas, com refinamento de malha adaptativa prescrita pelo algoritmo de de Boor e uma aproximação da derivada espacial através de uma diferença finita central de segunda ordem. O campo de temperaturas e a posição da fronteira móvel são determinados simultaneamente, de modo acoplado, através de um processo incremental: (i) solução numérica no instante n (T^n, s^n) , (ii) equidistribuição da malha e (iii) solução numérica no instante $n+1$ (T^{n+1}, s^{n+1}) . Para evitar instabilidades numéricas provenientes da condição inicial e da condição de fronteira, o problema é resolvido

entre $0.0012 \leq t \leq 0.5$. Neste caso as condições iniciais e de fronteira para o instante inicial são fornecidos pelas soluções teóricas.

A Figura 15a) apresenta a evolução da malha ao longo do tempo, com um incremento de tempo $\Delta t = 0.01$ e para uma discretização espacial com $N = 80$, podendo verificar-se um maior refinamento da malha junto à fronteira móvel, onde existe uma maior variação da temperatura. Em c) e d) encontram-se representadas as soluções numéricas e analíticas da posição da fronteira móvel e do perfil de temperaturas no instante $t = 0.5$. A solução numérica permite verificar que ao fim de 0.5 [s] a fronteira móvel já se encontra na coordenada $x = 0.323[m]$.

2.6 Método de refinamento estático: N variável

Num processo de geração de malha adaptativa, o critério de maior relevância está em se determinar quando e em que zona do domínio é que o refinamento de malha se mostra necessário. Para este efeito, a decisão é baseada numa estimativa do erro, em que um estimador de erro, determinado com base nos valores da solução da malha actual, é comparado com um valor de erro máximo admissível. A redefinição da malha, pode ser efectuada de forma uniforme, em que todos os elementos da malha são subdivididos e dão origem a uma malha mais refinada e uniforme, ou de modo não-uniforme, em que, considerando a estimativa do erro local, se subdivide unicamente os elementos que não cumprem o critério do erro máximo admissível. O segundo método mostra-se numericamente mais económico por originar malhas de dimensão mais reduzida.

A utilização do método de refinamento de malha em conjunto com o método adaptativo permite alterar o número de nós da malha e garantir que o erro da solução, ou uma estimativa deste, se mantém num intervalo predeterminado. Seguindo a metodologia desenvolvida por [19] e mais tarde por [20] aplicada a problemas transientes, o critério de refinamento da malha é baseado numa medida da dificuldade de discretização espacial, considerado como estimador do erro, definida pela função erro:

$$\eta(t) = \left(\frac{1}{N} \int_{x_L}^{x_R} m(x, t) dx \right)^2 \quad (28)$$

Considerando uma tolerância estimada *a priori*, $RTOL$, e os parâmetros α e β , com $\alpha > 1$ e $0 < \beta < 1$, o objectivo é garantir que:

$$\beta.RTOL \leq \eta(t) \leq \alpha.RTOL \quad (29)$$

A especificação destes parâmetros é realizada de modo heurístico e dependente do problema. O número de refinamentos efectuados depende da diferença entre parâmetros. Se a diferença é grande são feitos poucos refinamentos e se esta é pequena são realizados mais refinamentos ao longo da simulação. Quando se verifica o critério anterior não é realizado qualquer refinamento da malha e aplica-se unicamente o critério da equidistribuição para adaptar a malha à solução.

Quando, após uma etapa de integração temporal, é determinado o estimador de erro, a decisão de aplicação do método-h consiste na aplicação do algoritmo seguinte.

$$\begin{aligned}
 & \text{if } (\eta(t) > \alpha.RTOL \text{ or } \eta(t) < \beta.RTOL) \text{ then} \\
 & \quad \text{compute } N^{n+1} \\
 & \quad \text{elseif } \beta.RTOL \leq \eta(t) \leq \alpha.RTOL \\
 & \quad \quad N^{n+1} = N^n \\
 & \quad \text{end}
 \end{aligned} \tag{30}$$

A nova dimensão da malha é definida por $N^{n+1} = N^n \cdot \sqrt{\eta(t)/RTOL}$ arredondado ao inteiro superior. Para evitar variação significativas da malha durante uma etapa de integração é imposto um valor máximo de 1.2 para o aumento do número de nós e um valor mínimo de 0.5 para a diminuição do número de nós. Após o cálculo do novo número de nós, (i) a solução u^n é interpolada para a nova malha, (ii) equidistribuição da malha pelo algoritmo de de Boor e (iii) recalculada a integração temporal anterior com a nova malha e solução.

Na Figura 16 e na Figura 17 são apresentados os resultados da aplicação do método de refinamento r-h aos problemas descritos nas secções anteriores. O problema de Burger é analisado com uma malha inicial de 81 nós e com os parâmetros: $RTOL = 2.5e^{-3}$, $\beta = 0.8$ e $\alpha = 1.2$. Ao problema de Stefan é aplicada uma malha inicial também de 81 nós com $RTOL = 10e^{-3}$, $\beta = 0.9$ e $\alpha = 1.2$.

Quando as duas ondas do problema de Burger se unem deixa de ser necessária uma discretização espacial refinada em duas zonas do domínio, podendo manter-se uma precisão numérica equivalente com um menor número de nós, $N = 63$. Após este ponto verifica-se que o estimador de erro se mantém aproximadamente constante.

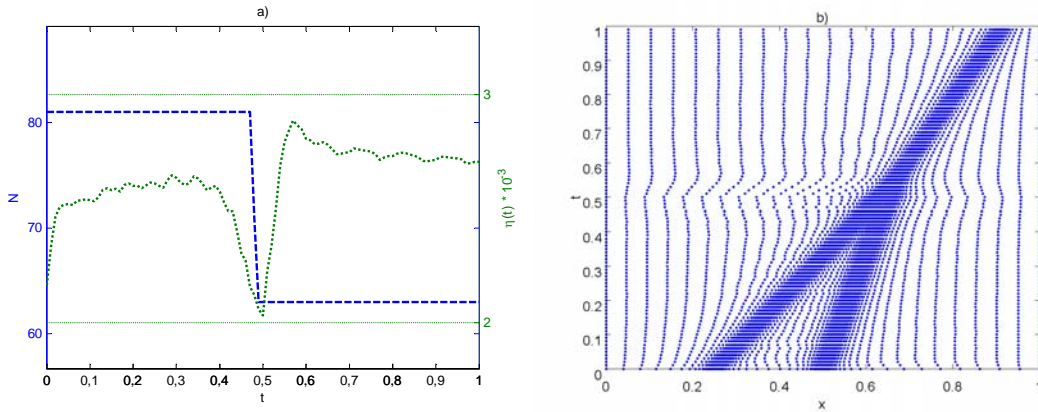


Figura 16 – Resultados da aplicação do método r-h aplicado à equação de Burger ($\mu = 1e^{-3}$ e $N^0=81$). a) Evolução do estimador de erro e do numero de nós. b) Evolução espacial da malha com o tempo.

Relativamente ao problema de Stefan, a dimensão da malha inicial só é utilizada nos primeiros incrementos de tempo, passando para $N = 75$ no instante $t = 0.0048[s]$, para

$N = 71$ no instante $t = 0.1596[s]$ e para $N = 68$ no instante $t = 0.3888[s]$. Como o perfil de temperaturas em ambas as fases é tendencialmente linear, é de esperar um contínuo decréscimo do número de nós necessário para a discretização espacial.

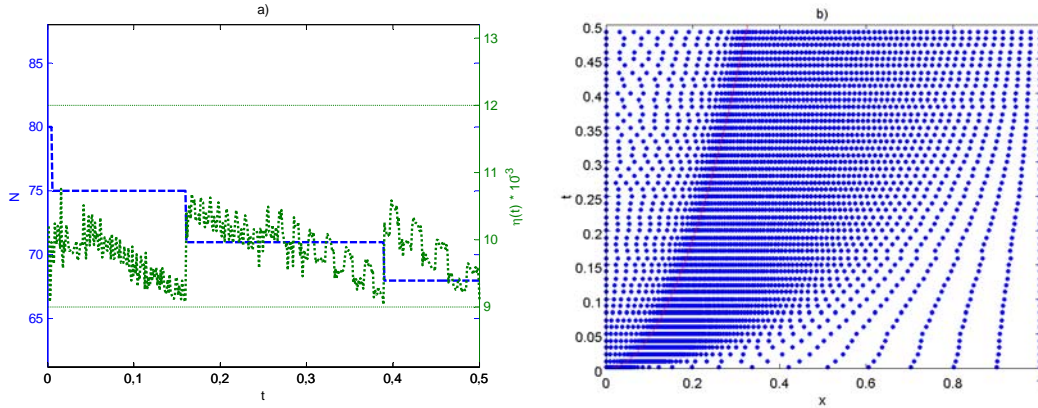


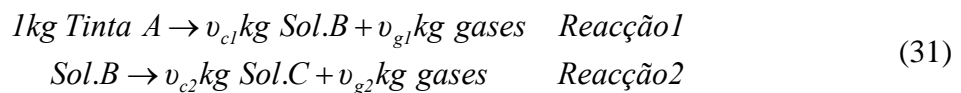
Figura 17 - Resultados da aplicação do método r-h aplicado ao problema de Stefan ($N^0=81$). a) Evolução do estimador de erro e do numero de nós. b) Evolução espacial da malha com o tempo.

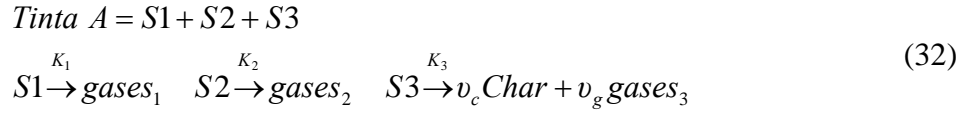
Os resultados da aplicação do método numérico aos problemas apresentados permite concluir da sua aplicabilidade a problemas transientes com domínio espacial fixo ou caracterizado por fronteiras móveis.

3. MODELO NUMÉRICO DO PROCESSO DE INTUMESCÊNCIA

Quando a protecção intumescente entra em contacto com os gases quentes provenientes de um incêndio, começa a formar bolhas, originando uma expansão volumétrica com perda de massa. Esta camada carbonosa, de baixa densidade e porosa, proporciona uma redução da transferência de calor à camada virgem de tinta subjacente e, portanto, para o substrato.

O processo, a interacção das reacções químicas e seus produtos que ocorrem entre os componentes activos presentes na formulação das tintas intumescentes ainda não são totalmente conhecidos, pelo que os modelos de comportamento, mecanismos de reacção e os parâmetros cinéticos utilizados nos modelos numéricos são, quase exclusivamente, determinados experimentalmente. A termogravimetria e os testes realizados em calorímetro de cone são os métodos experimentais utilizados com mais frequência, [21-22]. A complexidade dos mecanismos de reacção leva à utilização de modelos mais ou menos simplificados definidos por uma única reacção ou duas etapas de decomposição (31) a modelos mais complexos definidos pela degradação dos componentes principais da tinta (32), como definido por Di Blasi [23]. A aplicação deste último necessita do peso mássico de cada componente na formulação da tinta, os quais, por razões de confidencialidade e de propriedade, normalmente não são divulgados pelos fabricantes das tintas.





A decomposição dos componentes principais da tinta S1, S2 e S3, com pesos mássicos iniciais: $Y10 = 0.28$, $Y20 = 0.17$ e $Y30 = 0.55$, é definida por três reacções independentes estabelecidas pela equação de Arrhenius: $K_i = A_i \exp(-E_i/RT)$, $i = 1, \dots, 3$. Onde E é a energia de activação, A é o factor pré-exponencial e R a constante dos gases perfeitos. Os valores utilizados na análise numérica são os apresentados por Di Blasi [23].

O processo de intumescência ocorre através da decomposição do componente S2 que define a quantidade de gás libertado e acumulado na forma de bolhas. O volume de bolhas aumenta com a produção de mais gases e com o aumento da temperatura definido pela equação dos gases perfeitos. A expansão de cada diferença finita é limitada ao valor máximo determinado em cada ensaio experimental, conforme definido na equação seguinte.

$$\Delta x_i = \Delta x_0 + \frac{M_0(Y20 - Y2i)RT_i}{P_0 W_{g2}}, \text{ com } \Delta x_i \leq E \Delta x_0 \tag{33}$$

Os gases produzidos em excesso, em relação à quantidade necessária para produzir a expansão máxima, são instantaneamente libertados da camada intumescente. O campo de temperaturas é determinado pela equação de condução de calor, considerando que cada fracção mássica de tinta virgem, gases e material carbonoso se encontram em equilíbrio térmico.

Na superfície inferior da placa de aço é imposta uma condição de fronteira adiabática e na interface do aço com a camada de tinta virgem assumido um contacto térmico perfeito. A condição de fronteira imposta na superfície do material de protecção em contacto com os gases de incêndio é definida pela equação seguinte.

$$k_{eff} \frac{\partial T}{\partial x} = h_c (T_g - T_s) + \varepsilon \sigma (T_g^4 - T_s^4) \tag{34}$$

Na equação anterior ε representa a emissividade da superfície do intumescente, considerada constante e igual a 0.9, σ é a constante de Stefan-Boltzmann, h_c o coeficiente de transferência de calor por convecção, igual a 25 [W/(m²K)] [24]. T_s e T_g representam a temperatura da superfície e a temperatura dos gases de incêndio, respectivamente. Esta última é definida pela curva de incêndio padrão ISO834, como apresentada em [24]. A condutividade efectiva do material intumescente é determinada pela fracção sólida de material virgem, camada carbonosa e pela condutividade dos gases existentes, quantificados pela porosidade. A condutividade dos gases é definida pela equação (35), [25].

$$\begin{aligned}
k_s &= (Y1 + Y2 + Y3)k_v + Y_c k_c \\
k_g &= 1.3 \times 10^{-11} T^3 - 4.5 \times 10^{-8} T^2 + 9.4 \times 10^{-5} T + 0.0014 \left[\frac{\text{W}}{\text{mK}} \right] \\
k_{eff} &= (1 - \varphi)k_s + \varphi k_g
\end{aligned} \tag{35}$$

O sub-índice s representa a matéria sólida, enquanto que v , c e g representam a matéria virgem, carbonosa e gás, respectivamente. A porosidade do intumescente é definido por φ .

A solução numérica é obtida através do método das diferenças finitas, considerando diferenças finitas uniformes no domínio definido pela espessura da placa e não uniformes no domínio do intumescente.

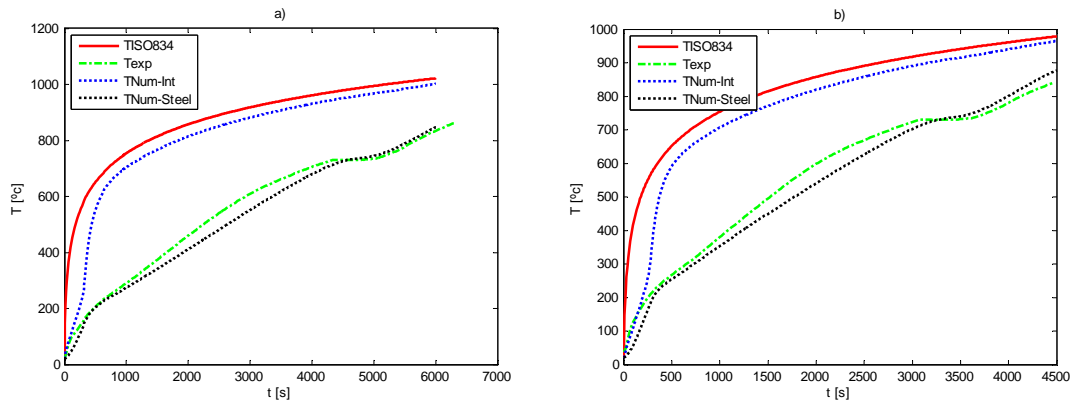


Figura 18 – Comparação dos resultados numéricos e experimentais da evolução da temperatura do aço. a) teste 12. b) teste 11.

A Figura 18 apresenta a comparação dos resultados numéricos e experimentais da evolução da temperatura do aço dos testes 11 e 12, e apresenta a variação da temperatura da superfície intumescente em contacto com os gases de incêndio.

As figuras apresentadas permitem verificar que o modelo numérico permite obter uma estimativa da evolução da temperatura do aço, conseguindo capturar a tendência da evolução medida experimentalmente. Em ambos os casos, para um período de tempo intermédio, a temperatura obtida numericamente é inferior à temperatura medida experimentalmente, com uma diferença máxima de 54 [°C].

4. CONCLUSÕES

Foi apresentado um método numérico baseado no método das diferenças finitas com uma discretização espacial de malha adaptativa com refinamento local definido por uma estimativa local de erro. Este algoritmo foi aplicado com êxito aos problemas unidimensionais de Stefan e de Burger.

Adicionalmente é descrito o procedimento experimental de avaliação do desempenho de duas tintas intumescentes aplicadas como material de protecção contra incêndio. São apresentados os resultados de um conjunto de ensaios experimentais efectuados em placas de aço com

diferentes espessuras de protecção, conduzidos num forno de resistência ao fogo. É analisada a evolução da temperatura do aço e a variação da camada intumescente, a qual permite concluir que a expansão máxima da intumescência depende da espessura seca inicial. Para uma espessura seca inicial de aproximadamente 1000 [μm] a expansão máxima da tinta A e B é de 30 e 70 vezes, respectivamente. O método numérico é aplicado a um modelo de análise do processo de intumescência, desenvolvido por di Blasi, com algumas adaptações apresentadas. O modelo quantifica a decomposição da tinta em gases e matéria carbonosa, e considerando a expansão do intumescente permite a determinação da evolução da temperatura nas placas de aço.

REFERÊNCIAS

- [1] Mesquita, L., P. Piloto, M. Vaz, and T. Pinto, *Decomposition of intumescent coatings: comparison between numerical method and experimental results*. Acta Polytechnica: Journal of Advanced Engineering, 2009. **49**(1): p. 60-65.
- [2] CEN, *EN1363-1: Fire resistance tests. General requirements*. 1999, European Committee for Standardization
- [3] Zegeling, P., *Moving Grid Techniques*, in *Handbook of Grid Generation*, N.P. Weatherill, B.K. Soni, and J.F. Thompson, Editors. 1998, CRC Press.
- [4] Miller, K. and R.N. Miller, *Moving Finite Elements*. SIAM Journal of Numerical Analysis, 1981. **18**: p. 1033-1057.
- [5] White, A.B.J., *On the Numerical Solution of Initial/Boundary-Value Problems in One Space Dimension*. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1982. **19**(4): p. 683-697.
- [6] Wouwer, A.V., P. Saucez, and W.E. Schiesser, *Adaptive Method of Lines*. Vol. null. 2001: Chapman and Hall/CRC.
- [7] Verwer, J.G., J.G. Blom, and J.M. Sanz-Serna, *An adaptive moving grid method for one-dimensional systems of partial differential equations*. Journal of Computational Physics, 1989. **82**(2): p. 454-486.
- [8] Dorfi, E.A. and L.O.C. Drury, *Simple adaptive grids for 1 - D initial value problems*. Journal of Computational Physics, 1987. **69**(1): p. 175-195.
- [9] Huang, W., Y. Ren, and R.D. Russell, *Moving mesh methods based on moving mesh partial differential equations*. J. Comput. Phys, 1994(113): p. 279-290.
- [10] Li, S. and L. Petzold, *Moving Mesh Methods with Upwinding Schemes for Time-Dependent PDEs*. Journal of Computational Physics, 1997. **131**(2): p. 368-377.
- [11] de Boor, C., *Good approximation by splines with variable knots II*, in *Conference on the Numerical Solution of Differential Equations*, G. Watson, Editor. 1974, Springer Berlin / Heidelberg. p. 12-20.
- [12] Kopteva, N. and M. Stynes, *A Robust Adaptive Method for a Quasi-Linear One-Dimensional Convection-Diffusion Problem*. SIAM Journal on Numerical Analysis, 2001. **39**(4): p. 1446-1467.
- [13] Xu, X., W. Huang, R.D. Russell, and J.F. Williams, *Convergence of de Boor's algorithm for the generation of equidistributing meshes*. IMA Journal of Numerical Analysis, 2010.

- [14] Wouwer, A.V., P. Saucez, and W.E. Schiesser, *Simulation of Distributed Parameter Systems Using a Matlab-Based Method of Lines Toolbox: Chemical Engineering Applications*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2003. **43**(14): p. 3469-3477.
- [15] Mackenzie, J.A. and M.L. Robertson, *The numerical solution of one-dimensional phase change problems using an adaptive moving mesh method*. Journal of Computational Physics, 2000. **161**(2): p. 537-557.
- [16] Tadi, M., *A Four-Step Fixed-Grid Method for 1D Stefan Problems*. Journal of Heat Transfer, 2010. **132**(11): p. 114502-4.
- [17] Javierre, E., C. Vuik, F.J. Vermolen, and S. van der Zwaag, *A comparison of numerical models for one-dimensional Stefan problems*. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2006. **192**(2): p. 445-459.
- [18] Crank, J., *Free and moving boundary problems*. 1987, Oxford: Oxford University Press.
- [19] Hyman, J.M., S. Li, and L.R. Petzold, *An adaptive moving mesh method with static rezoning for partial differential equations*. Computers & Mathematics with Applications, 2003. **46**(10-11): p. 1511-1524.
- [20] Mackenzie, J.A. and W. Mekwi, *An adaptive moving mesh method with local mesh refinement for singularly perturbed PDEs*, in *International Conference on Boundary and Interior Layers (BAIL) Proceedings*. 2004: Toulouse, France.
- [21] Jimenez, M., S. Duquesne, and S. Bourbigot, *Kinetic analysis of the thermal degradation of an epoxy-based intumescent coating*. Polymer Degradation and Stability, 2009. **94**(3): p. 404-409.
- [22] Lautenberger, C. and C. Fernandez-Pello, *Generalized pyrolysis model for combustible solids*. Fire Safety Journal, 2009. **44**(6): p. 819-839.
- [23] Di Blasi, C., *Modeling the effects of high radiative heat fluxes on intumescent material decomposition*. Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2004. **71**(2): p. 721-737.
- [24] EN1991-1-2, *Eurocode 1: Actions on Structures, Part 1.2: General Actions, Actions on Structures Exposed to Fire*. 2002, European Committee for Standardization
- [25] Grujicic, M., C. Zhao, S. Biggers, J. Kennedy, and D. Morgan, *Heat Transfer and Effective Thermal Conductivity Analyses in Carbon-Based Foams for Use in Thermal Protection Systems*. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part L: Journal of Materials: Design and Applications, 2005. **219**(4): p. 217-230.